モンテカルロ対角化法からみた $\nu = 1/2$ 状態

東京大学大学院理学系研究科　小野田 勝 [1], 水崎高浩 [2], 大塚孝治 [3], 青木秀夫 [4]

Landau 準位占有率 $\nu = 1/2$ の磁場中の2次元電子系は、複合フェルミオン描像の平均場近似では無磁場中の自由 Fermi 気体と見なされるが、ゲージ場の揺らぎや電子間 Coulomb 相互作用を考慮した場合に Landau の Fermi 液体理論に整合するか否かなどは未解決である。我々は、モンテカルロ対角化法（有限系の対角化に際する基底の importance sampling ）を、分数量子 Hall 系に初めて適用して数値的に有限系の低エネルギー励起スペクトルを求め、自由 Fermi 気体の励起スペクトルとの対応を調べた。

1　はじめに

分数量子 Hall 効果 [1] とは、2次元電子系に強磁場をかけたときに Hall 伝導度が e^2/h の分数倍に量子化される現象であるが、その本質は多体効果により、荷電励起にギャップを伴うような量子液体状態になっていることである。このギャップは磁場中電子の1体描像における Landau 準位間隔ではなく、相互作用により生じたものであり、Coulomb エネルギーのオーダーで現れる。また、このような特殊な非圧縮性状態は、電子を複合ボソンに変換すると、平均場近似では複合ボソンの Bose-Einstein 凝縮として解釈できる [2, 1]。あるいは、複合フェルミオン描像においては、平均場近似では複合フェルミオンの整数量子 Hall 状態として解釈される [3, 1]。つまり、荷電励起ギャップは複合フェルミオンの有効 Landau 準位間隔で与えられる。

以上の単純な描像では、分数量子 Hall 効果は純粋に多体効果なのに、複合粒子描像のどこにも電子間相互作用の効果が取り入れられていない。この点は、相関を取り入れた最近の複合粒子理論が解明しつつあるが、一言で言えば、電子が斥力相互作用のために他の電子を排除する効果（相関正孔）を、自由複合粒子の磁束が実効的に表現する、という事情がたまたま有利に働いたと考えられる。つまり、Coulomb 斥力相互作用の存在下で複合粒子描像がどのように正当化されるかについての明確な描像は未だに open question であり、これを数値的に調べるのが本研究の主要テーマである。

ここでは上で述べた二つの複合粒子描像のうち、複合フェルミオン描像を取り上げる。この主な理由は、粒子の統計性を変えない、分数量子 Hall 状態間の相対的安定性をよく説明できる、ま

[1] E-mail:onoda@cms.phys.s.u-tokyo.ac.jp
[2] E-mail:mizusaki@phys.s.u-tokyo.ac.jp
[3] E-mail:otsuka@phys.s.u-tokyo.ac.jp
[4] E-mail:aoki@phys.s.u-tokyo.ac.jp

た、なによりも2次元非 Fermi 液体（あるいは marginal Fermi 液体）として注目される $\nu = 1/2$ 状態 [4] へのアプローチに適していると考えられるからである。

以下では特に励起スペクトルから $\nu = 1/2$ 状態の特徴を調べる。低エネルギー励起スペクトルの全体像を知るため、有限系の数値計算によるアプローチをとった。さらに、複合フェルミオン描像の平均場近似において $\nu = 1/2$ 状態がギャップレスとなることの真偽が興味の焦点であること、実験的にもギャップレスな振舞いが観測されていることを考慮し、系のサイズ・スケーリングを試みた。そして、この目的のために厳密対角化の限界を越えた数の粒子系を扱う必要から、モンテカルロ対角化法 [5] を採用した。

2 複合フェルミオン描像および球面系

直観的には、複合フェルミオンは電子に偶数本の磁束量子を貼り付けたものとして定義される。複合フェルミオンの感じる有効磁場は、平均場の範囲では $B_{\text{eff}} = B - 2l\phi_0\rho$ となる。B は一様外部磁場、lは整数で、$2l$ は貼り付けた磁束量子の数、また以下では $c = 1$, $h = 2\pi$ の単位系をとり、$\phi_0 \equiv 2\pi/e$ は磁束量子, ρ は電子の数密度であり、複合フェルミオンの数密度もこれに等しい。このとき、複合フェルミオンの有効 Landau 準位占有率を $\nu_{\text{CF}} \equiv 2\pi\rho/|eB_{\text{eff}}|$ で定義すると、$\nu = \nu_{\text{CF}}/|2l\nu_{\text{CF}} \pm 1|$ の関係が得られる。特に、整数本の有効 Landau 準位を占有している状態（$\nu_{\text{CF}} = p$, p は正整数）は、もとの電子系でみたとき、$\nu = p/|2lp \pm 1|$ という系列の分数量子 Hall 状態に対応している。つまり、分数量子 Hall 状態におけるギャップは、複合フェルミオン描像の平均場近似において、有効 Landau 準位間隔として解釈される。また、複合フェルミオンの感じる有効磁場がゼロとなる状態を考えると、$\nu_{\text{CF}} \to \infty$ の極限であり、もとの電子系でみると $\nu = 1/|2l|$ という偶数分母の系列に対応している。

分数量子 Hall 系の研究において、有限系の数値計算は一つの有力な方法であるが、特にバルクの性質を調べる場合、端のないトーラスあるいは球面がよく使われる。ここでは、球面系を採用することにする。これは、系の回転対称性により、相互作用の行列要素を擬ポテンシャルで記述できるという利点があるためである [7]。

半径 R の球面上における1電子ハミルトニアンは、$H_0 = |\boldsymbol{x} \times \{-i\boldsymbol{\nabla} + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\}|^2/(2mR^2)$ で与えられる。ここで、$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ は外部磁場を表すベクトル・ポテンシャルである。球面の各点に垂直な一様磁場をかけるには、球の中心に磁気単極子をおけばよい。ただし、Dirac の量子化条件 [8] により、全磁束は磁束量子 ϕ_0 の整数倍 $2S\phi_0$ （$2S$ は正整数）でなければならない。つまり、磁束密度を $B > 0$ として $4\pi R^2 B = 2S\phi_0$ となる。このとき、1電子スペクトル $\epsilon = \{l(l+1) - S^2\}/(2mR^2)$ が得られる。（l は S 以上の半整数あるいは整数。）したがって、球面系の最低 Landau 準位は、$l = S$ の状態である。また、最低 Landau 準位の全状態数は、$2S + 1$ で与えられるが、球面の曲率の効果から、無限平面系における Landau 準位占有率 ν の状態に対応するのは、電子数を N として $(N-1)/(2S) = \nu$ であることが知られている [7]。

次に電子間の相互作用を Coulomb 型であるとし、さらに最低 Landau 準位射影を行うと、擬ポテンシャル V_J [9, 1] を用いた表現が得られる。ここで詳細は述べないが、球面系2電子状態の

無限平面系への写像より、V_{2S-m} は相対角運動量 m の電子間のポテンシャルを表している。したがって、m の大きい状態は電子間の平均距離が離れている状態に対応するから、m の小さいものはポテンシャルの短距離成分を、m の大きいものは長距離成分を表している。

先に述べたように、$\nu = 1/2$ 状態は複合フェルミオン描像の平均場近似においては、無磁場中自由 Fermi 気体と見なすことができる。前述の磁場中の例において、$S = 0$ の置き換えをすれば、無磁場中の 1 粒子スペクトル $\epsilon = l(l+1)/(2mR^2)$ （l はゼロ以上の整数）が得られる。

3 モンテカルロ対角化法およびサイズ・スケーリング

モンテカルロ対角化法 [5] とは、端的に言って対角化の際に基底の importance sampling を行うことであり、元々原子核のために本間、水崎、大塚らにより開発された方法である。具体的にはまず、一般的に 2 体の相互作用を含む系のハミルトニアンは、以下のように書き直す事ができる。

$$H = \sum \epsilon_{ij} {C_i}^\dagger C_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} {C_i}^\dagger {C_j}^\dagger C_k C_l \to \sum_\alpha \left(E_\alpha O_\alpha + \frac{1}{2} V_\alpha {O_\alpha}^2 \right). \tag{1}$$

ただし、${C_i}^\dagger$ は i 状態の生成演算子、O_α は適当な量子指標 α をもつ 1 体演算子である。このとき、密度演算子は Hubbard-Stratonovich 変換 [10] をもちいて

$$e^{-\beta H} \simeq \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha,n} d\sigma_{\alpha\,n} \left(\frac{\Delta\beta |V_\alpha|}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\sum_{\alpha,n} \frac{\Delta\beta}{2} |V_\alpha| \sigma_{\alpha\,n}^2} \prod_n e^{-\Delta\beta \sum_\alpha (E_\alpha + s_\alpha V_\alpha \sigma_{\alpha\,n}) O_\alpha}. \tag{2}$$

のように表せる。ただし、虚時間 β のスライスの数を N_τ としたとき、$\Delta\beta \equiv \beta/N_\tau$ であり、$V_\alpha < 0\,(>0)$ に対して $s_\alpha = 1\,(=i)$ である。通常のモンテカルロ法と違うところは、前述の積分を行う代わりに、上の式におけるガウシアンの重みで確率的に（さらに、エネルギーの最低固有値を下げるように）、補助場 $\sigma_{\alpha\,n}$の値を選び、

$$|\Phi(\sigma) > \propto \prod_{n=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\beta \sum_\alpha (E_\alpha + s_\alpha V_\alpha \sigma_{\alpha\,n}) O_\alpha} \prod_i^N \tilde{C}_i^\dagger |0>, \quad \tilde{C}_i^\dagger \equiv \sum_j^N x_{ij} C_j^\dagger, \tag{3}$$

の手続きにより基底を順次生成しながら対角化を行う。

また、系の対称性から、保存量（例えば角運動量）が存在するときには、その保存量の射影演算子を導入することにより、角運動量の同時固有状態を扱うこともできる。

つぎに、球面系のサイズ・スケーリングについて述べる。まず、磁場中の電子系について考える。特定の状態にある様々なサイズの系を較べたとき、サイズによらず系を特徴づける量として電子密度 ρ と磁束密度 B がある。したがって、ある特定の状態のサイズ依存性を見る場合には、これら二つの量を固定して、電子数、半径、全磁束を変化させれば良いことがわかる。具体的には、電子数 N を増やした場合、系の半径を $R^2 = (N-1)/(4\pi\rho)$ のように、磁束の本数を $2S = (N-1)/\nu$ のように増やせばよいことになる。一方、対応する無磁場中自由 Fermi 気体を考えた場合、磁束の本数はゼロのままで、系の半径を前述と同様にスケールさせればよい。

$\nu = 1/2$ 系は、複合フェルミオン平均場では無磁場中自由 Fermi 気体に写像される。球面上で無磁場中自由 Fermi 気体を考えると、角運動量 l 固有状態に電子が収納されて行き、$N = (l_F + 1)^2$

の場合は l_F の殻に詰まった closed shell 状態、これ以外では non-interacting の場合に基底状態が縮退している open shell 状態である。$l_F = 0, 1, \cdots$ は、詰まった l の最大値であるが、球面上の角運動量は、立体射影により平面上の運動量に $k = l/R$ の関係で対応するので、ここでは Fermi 角運動量と呼ぼう。磁場中電子系の場合、相互作用があれば全角運動量に関する縮退は解けるが、基底状態の全角運動量は、無磁場中自由 Fermi 気体の縮退準位に電子が Hund の第 2 法則 にしたがって詰まる、という描像で解釈できるような nonzero 値をとることが知られている [11]。

本研究では特に closed shell の $N = (l_F + 1)^2$ を満たす系のサイズ依存性を調べた。これは、無限平面系との対応を考えた場合、基底状態は全角運動量がゼロの状態であるから、この系列を見るべきと考えられるからである。このとき、無磁場中自由 Fermi 気体のギャップ $\Delta = (l_F+1)/(mR^2)$ は、N と共に $\sqrt{N}/(N-1)$ のようにゼロに近づく。

$\nu = 1/3$ における（厳密対角化法による）計算 [9] および $\nu = 1/2$ における（厳密対角化法と $N = 16$ のモンテカルロ対角化法による）計算から得られた、電子系の第 1 励起エネルギーのサイズ依存性を調べた。ただし、$\nu = 1/2$, $N = 4$ の場合は全角運動量が $3\,(= 2l_F + 1)$ の励起エネルギーである。これは、$N = 9, 16$ の場合に第 1 励起の全角運動量が $2l_F + 1$ であることによる。現段階ではっきりした結論を述べるのは尚早であるが、$\nu = 1/3$ の場合に $N \to \infty$ への外挿において、ギャップが残る傾向が見られるのに対して、$\nu = 1/2$ の場合には、この極限においてギャップレスとなる傾向がみられた。

4 励起スペクトルの相互作用依存性

はじめに述べたように複合粒子描像は、電子系の斥力相互作用によって初めて正当化され得て、$\nu = 1/q$ （q は奇数）で相互作用が短距離の場合は Laughlin 波動関数が厳密になり、複合粒子平均場解とも一致する。すると、相互作用の距離依存性を変化させたときのスペクトルの変化に興味がもたれる。この観点から、擬ポテンシャル V_{2S-m} の m 依存性を変化させ、$\nu = 1/2$ 状態における励起スペクトルの相互作用依存性を調べた。具体的には、$V_J \to V_J^* = V_J^a$ （$a = 1$ のとき Coulomb 型、$a < 1$ のとき長距離型、$a > 1$ のとき短距離型）の変換を行い、それぞれの場合の励起スペクトルを無磁場中自由 Fermi 気体のものと較べてどのような特徴がみられるかを調べた。ここでは特に、$\nu = 1/2$, $N = 9$ の場合に厳密対角化法を用いて行った。

得られた結果より、相互作用が長距離型になるほど自由 Fermi 気体のものに近づき、短距離型になるほど特徴的なカスプ構造が見てとれた。($\nu = 1/3$ の場合には、このような傾向は見られない。）ここで興味深いのは相互作用が短距離型になり、その特徴がより顕著になった場合でも、カスプの頂点となる状態の全角運動量は、自由 Fermi 気体の Fermi 角運動量を l_F （$N = 9$ の場合、 $l_F = 2$）とした場合、$2l_F + 1, 4l_F, \cdots$, に一致し続ける。このことは、1 次元系における朝永-Luttinger 液体の場合と似ている。(1 次元では、自由系の段階で励起スペクトルにカスプがみられる。また、相互作用により朝永-Luttinger 液体となってもその位置は変わらない。無限系の場合、このカスプの位置は $2nk_F$ に現れる。ただし、n は整数。）

また、複合フェルミオンの有効ゲージ理論をもちいた、乱雑位相近似 [4] および繰り込み群 [12]

による解析においても、朝永-Luttinger 液体との類似が見て取れる。Coulomb 型よりも短距離型の相互作用の場合、複合フェルミオン1体相関関数が極ではなく branch cut をもち、ゲージ相互作用の結合定数（正確にはその2乗に Fermi 速度を掛けたもの）は non-trivial な赤外固定点をもつようになる。さらに、短距離型になるほど準粒子描像は悪くなり、赤外固定点における結合定数は大きくなる。

今後は、有限系の数値計算において相関関数も含めて、以上の観点から調べていく予定である。また、ここでは簡単のためにスピン自由度 [6] を無視したが、これについても考えたい。

参考文献

[1] 例えば、中島龍也、青木秀夫：「多体電子論 III　分数量子ホール効果」（東大出版会、1999）参照。

[2] S. M. Girvin and A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **58** (1987), 1252; S. C. Zhang, T. H. Hansen, and S. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **62** (1989), 82; N. Read, Phys. Rev. Lett. **62** (1989), 86; Z. F. Ezawa, M. Hotta, and A. Iwazaki, Phys. Rev. B **46** (1992), 7765.

[3] J. K. Jain, Phys. Rev. Lett. **63** (1989), 199; Phys. Rev. B **40** (1989) 8079; *ibid* **41** (1990) 7653; Adv. Phys. **41** (1992) 105; Surf. Sci. **263** (1992) 65. A. Lopez and E. Fradkin, Phys. Rev. B **44** (1991), 5246.

[4] B. I. Halperin, P. A. Lee, and N. Read, Phys. Rev. B **47** (1993), 7312; B. L. Altshuler, L. B. Ioffe, and A. J. Millis, Phys. Rev. B **50** (1994), 14048.

[5] M. Homma, T. Mizusaki, and T. Otsuka, Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 1284; *ibid* **77** (1996) 3315; T. Mizusaki, M. Homma, and T. Otsuka, Phys. Rev. C **53** (1996) 2786.

[6] T. Nakajima and H. Aoki, Phys. Rev. Lett. **73** (1994), 3568; Surf. Sci. **361/362** (1996), 83; A. Lopez and E. Fradkin, Phys. Rev. B **51** (1995), 4347.

[7] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **51** (1983), 605.

[8] P. A. M. Dirac, Proc. R. Soc. London, Ser. A **133** (1931), 60.

[9] G. Fano, F. Ortolani, and E. Colombo, Phys. Rev. B **34** (1986), 2670.

[10] 例えば、黒木和彦、青木秀夫：「多体電子論 II　超伝導」（東大出版会、1999）、付録B参照。

[11] E. Rezayi and N. Read, Phys. Rev. Lett. **72** (1994), 900.

[12] C. Nayak and F. Wilczek, Nucl. Phys. B **417** (1994), 359; *ibid* **430** (1994), 534; S. Chakravarty, R. E. Norton, and O. F. Syljuåsen, Phys. Rev. Lett. **74** (1995), 1423; I. Ichinose and T. Matsui, Nucl. Phys. B **441** (1995), 483; M. Onoda, I. Ichinose, and T. Matsui, *ibid* **446** (1995), 353.